1次元不完全格子における重い粒子のBrown運動

桜　井　明　夫（東大理）

（10月20日受理）

「Rubin等によつてとりあつかわれてきたisotopic defectの運動の問題を、Moriの不可逆過程とBrown運動の一般理論に従つて見なおした。impurityに働くrandom force $f(t)$，そのcorrelation function $\varphi(t)$，momentum correlation function $\Xi(t)$の連分数展開等が、explicitに求められた点が特徴である」

1° 強さKの調和的バネで結合された、質量Mの多粒子からなる格子系の中に質量$M'=(1+Q)M$の一つの不純物があつたとする。1次元の場合、このisotopic impurityのmomentum correlationは、$Q\to\infty$，$\omega_L/Q=\mathrm{const}$，$\omega_L\equiv 2\sqrt{K/M}$の極限で、時間tの十分大きいところで、

$$\frac{\langle p(t)\,p\rangle}{\langle p^2\rangle}\simeq e^{-\omega_L/Q\cdot t}$$

の形をとることが、Rubin[1)]によつて指摘されていた。ただし粒子の個数は無限大として、Poincaré cycleを無限に長くとつて考えている。この式での平均は、$t=0$でのアンサンブル平均であつて、はじめに格子はcanonical分布であらわされる熱平衡にあつた。この問題はisotropicなる3次元s.c. latticeでは、

$$\frac{\langle p_x(t)p_x\rangle}{\langle p_x^2\rangle}\simeq e^{-\frac{1}{2}\beta t}\left[\cos\omega t-\frac{\beta}{2\omega}\sin\omega t\right]$$

$$\beta\simeq 2\omega_L/\pi Q$$

$$\omega\approx\frac{\omega_L}{\sqrt{Q}}$$

となる。Rubin　はこの統計力学的問題を、同値な力学的初期値問題に直して

といたのだが、不可逆過程の立場から見て気になるのは、これ等の結果がそれぞれ、自由粒子、あるいは調和振動子のしめすBrown 運動の形をしていることである。すなわちそれらは、Langevin 方程式、

$$\dot{v} = -\gamma v + f(t) \qquad （1次元の場合）$$

$$\dot{v} = -\gamma v - \alpha x + f(t) \qquad （3次元の場合）$$

の解になつているのだが、この式にあらわれる random force f(t) というのは、今の問題では何であり、それがいかに momentum correlation の時間的減衰に利いているのか、みたいわけである。

こうした問題をとりあつかうのに最も有効な方法は、最近森先生によつて導かれたBrown 運動の一般理論を用いることであろう。[2] Mori method に従えば力学量 A(t) の運動方程式は、exact に、一般化されたLangevin方程式の形に書きあらわされる。すなわち

$$\frac{d}{dt}A(t) = iLA(t) = -i\hat{\omega}A(t) - \int_0^t \varphi(s)A(s-t)ds + f(t) \quad .$$

$$\varphi(s) = (f(s), f^*)\cdot(A, A^*)^{-1}$$

$$i\hat{\omega} = (\mathring{A}(t), A^*)\cdot(A, A^*)^{-1}$$

$$f(t) = \exp[t(1-\mathcal{P})iL]K$$

$$K \equiv \mathring{A} - i\hat{\omega}A = (1-\mathcal{P})\mathring{A}$$

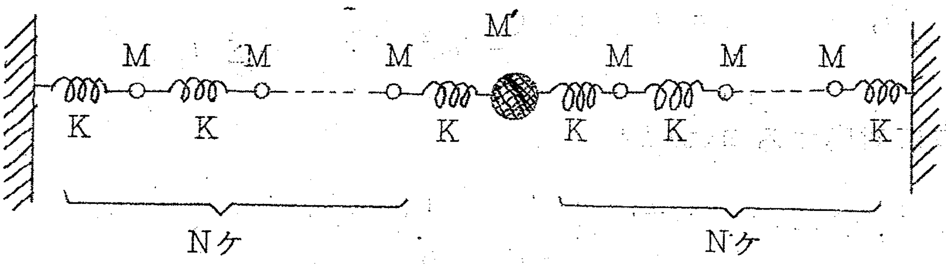
$\mathcal{P}$は初期値Aへの projection operator であり、又 scalar product は、

$$(A(t), B^*) \equiv \frac{1}{\beta}\int_0^\beta \langle e^{\lambda H}A(t)e^{-\lambda H}B^*\rangle d\lambda$$

で定義されている。

この一般論が、dynamical な統計力学の具体的問題にどう適用されるかは甚だ興味深いことだが、ここではその一例として、Rubin の問題をとりあげ impurity atom に対する一般化されたLangevin 方程式の書き下しを試みた。

2° 以下、1次元の場合を考える。Impurity



を中心にして左右にNケの質量Mの粒子が強さKのバネでつながれている。(両端はバネで壁につながれる) このような系ではimpurityを固定したとき二分されて出来る左右の完全格子での規準振動の座標で、左右の粒子の変位を展開することにより(impurityに相当する調和振動子)+(impurityと調和的にcoupleするが、互には独立であるNケの調和振動子)という系に移つて問題を考えることが出来る。これはToda-Kogure[3)]に従えば、S. modelといわれるmodelであつて、そのHamiltonianは

$$H=\frac{p^2}{2}+\frac{\omega_0^2}{2}x^2+\sum_S\left(\frac{p_S^2}{2}+\frac{\omega_S^2}{2}x_S^2\right)+\sum \Lambda_S x_S x$$

(p, x) …… impurityの座標

(p_S, x_S) … surroundingの座標　$s=-N\cdots -1, 1, \cdots N$

$$\omega_0^2=\frac{2K}{M'}$$

$$\omega_S^2=\omega_L^2\sin^2\frac{\pi s}{2(N+1)}$$

$$\Lambda_S^2=\frac{1}{2(N+1)}\frac{1}{Q+1}\omega_S^2(\omega_L^2-\omega_S^2)$$

で与えられる。以降の計算の途中で発散をふせぐために、impurity atomは格子とは別に、一定の振動数$\overline{\omega}^2$に対応するバネで原点に拘束されているとして、Hamiltonianにもこのtermをつけておく。のちに$\overline{\omega}^2\to 0$と考えてよい。

impurityの、変位と運動量とからつくられる2次元ベクトルAの運動を考

えよう。

$$A=\begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix}, \qquad \mathring{A}=\begin{pmatrix} \mathring{x} \\ \mathring{p} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} p \\ -(\omega_0^2+\overline{\omega}^2)\,x-\sum_s \Lambda_S\, x_S \end{pmatrix}$$

固有振動数に対応するmatrixは

$$i\hat{\omega}=(\mathring{A},A^*)\cdot(A,A^*)^{-1}=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\overline{\omega}^2 & 0 \end{pmatrix}$$

すなわちここではつけ加えたバネによる振動数のみがひろわれている。

Mori Theory でいうrandom force は、$t=0$ においては、Aの時間微分からAに固有な運動 $i\hat{\omega}A$ を引き去つた値で与えられ、今の場合、

$$K=\mathring{A}-i\hat{\omega}A=\begin{pmatrix} 0 \\ -\omega_0^2 x-\sum_s \Lambda_S\, x_S \end{pmatrix}\equiv f$$

従つて格子から受けている力は、形式的にすべてrandomな力とみなされることになる。

3° さてこのrandom force は、普通の意味での時間発展をするのでなく、Aと垂直な空間内で制限された運動をする。すなわち、

$$f(t)=\exp\{t(1-\mathscr{P})iL\}f\equiv\begin{pmatrix} 0 \\ f(t) \end{pmatrix}$$

ここで f(t) を次のように展開しよう。

$$f(t)=\exp\{t(1-\mathscr{P})iL\}f\doteqdot f+tf^{(1)}+\frac{t^2}{2!}f^{(2)}+\cdots$$

projection $\mathscr{P}$ は $A=\begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix}$ に対してされるから、

$$f^{(n)}=iLf^{(n-1)}-\frac{(iLf^{(n-1)},x^*)}{(x,x^*)}x-\frac{(iLf^{(n-1)},p^*)}{(p,p^*)}p$$

なる漸化式が与えられる。

我々が欲しいのは、random force の correlation function

$$\varphi(t)=(f(t),f^*)\cdot(A,A^*)^{-1}=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & (f(t),f^*) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{(x,x^*)} & 0 \\ 0 & \frac{1}{(p,p^*)} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \overline{\varphi}(t) \end{pmatrix}$$

であつて、これは $(f(t), f^*)$が求まれば決定される。この内積に対しては、前の展開での t の奇数剰の項は寄与しない。なんとなれば内積の展開項をみると f^* は x, x_S の linear な関数であるのに対し、$f^{(2n-1)}$ はそれらの時間微分である p, p_S の linear な関数であつて内積をゼロとするからである。$\varphi(t)$ が時間の偶関数であることは、physical に reasonable な結果であつた。さらにうまいことに、偶数べきの係数に対しては exact に

$$(f^{(2n)}, f) = \frac{1}{\beta} \sum_S \left(\frac{\Lambda_S}{\omega_S}\right)^2 (-1)^n \omega_S^{2n}$$

がえられる。($\overline{\omega}^2$ は cancel してあらわれない) 従つて random force の correlation function は explicit に求まり

$$\overline{\varphi}(t) = \sum_S \frac{\Lambda_S^2}{\omega_S^2} \cos(\omega_S t) = \int_0^{\omega_L} g(\omega) \frac{\Lambda(\omega^2)}{\omega^2} \cos(\omega t) d\omega$$

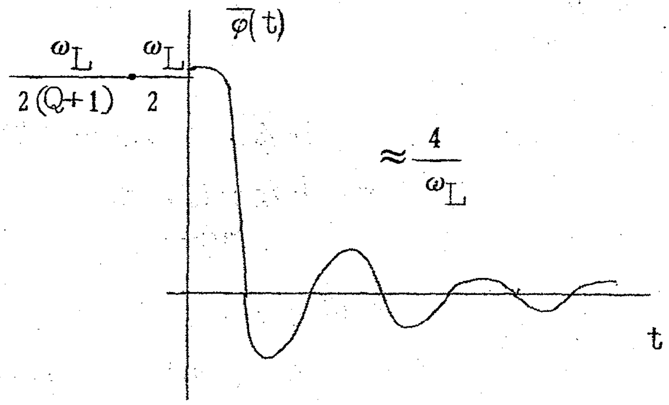
$$= \frac{\omega_L}{2(Q+1)} \frac{J_1(\omega_L t)}{t}$$

ここで $g(\omega)$ は regular lattice の normal mode の状態密度で、一次元では、

$$g(\omega) = \frac{2(N+1)}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_L^2 - \omega^2}}$$

である。

さて $\overline{\varphi}(t)$ は1次の Bessel 関数の性質から、$\omega_L / Q = \mathrm{const}$, $Q \to \infty$, $\omega_L \to \infty$ の極限で、δ 関数的になる。また有限の ω_L に対しては、$\overline{\varphi}(t)$ の



correlation time τ_c をほぼ $\tau_c \sim 1/\omega_L$ としてよい。一方Aの decay time を

$$\tau_r = \frac{1}{r} \approx \frac{1}{\int_0^\infty \varphi(t)\,dt} = \frac{Q+1}{\omega_L}$$

で estimate すると $Q \gg 1$ に対して、$\tau_r \gg \tau_c$ であつて、二つの運動の mode がよく分離されていることがわかる。上式で得られた r は、まさに Rubin の結果と同じである。

得られた Langevin 方程式を explicit に書けば

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} x(t) \\ p(t) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} p(t) \\ -\overline{\omega}^2 x(t) \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 \\ \int_0^t \overline{\varphi}(s)\,p(s-t)\,ds \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ f(t) \end{pmatrix}$$

$$\approx -\begin{pmatrix} 0 \\ r p(t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ f(t) \end{pmatrix}$$

である。

$t=0$ で impurity の変位、運動量を x , p と指定すれば、以降の平均値運動は、$\overline{\omega}^2 = 0$ として、

$$\begin{cases} \langle x(t) \rangle \approx x + \frac{1}{r}\left(1 - e^{-rt}\right) p \\ \langle p(t) \rangle \approx p\, e^{-rt} \end{cases}$$

で与えられることが、projection をとつた上式からわかる。これは Rubin

と同じである。

4° Mori method のもう一つの特徴は、projection を次々に行うことにより、$\Xi(t) \equiv (A(t), A^*) \cdot (A, A^*)^{-1}$ の連分数展開が得られることであつた。[4)]

今の問題で注目したいのは、特に impurity atom の運動量の correlation であるから、

$$\Xi_0(t) = \frac{(p(t), p^*)}{(p, p^*)}$$

とえらび、式の繁雑化を避けるため、1次元 vector A=p から出発する空間をとる。一般論に従えば、$\Xi_0(t)$ の Laplace 変換は、

$$\Xi_0(z) = \cfrac{1}{z - i\omega_0' - \cfrac{\Delta_1^2}{z - i\omega_1' + \cfrac{\Delta_2^2}{\ddots + \cfrac{\Delta_{n-1}^2}{z - i\omega_{n-1}' + \Delta_n^2 \, \Xi_n(z)}}}}$$

$$i\omega_j' \equiv \frac{(\mathring{f}_j, f_j^*)}{(f_j, f_j^*)}$$

$$\Delta_j^2 \equiv \frac{(f_j, f_j^*)}{(f_{j-1}, f_{j-1}^*)}$$

$$f_j = \left[1 - \sum_{l=0}^{j-1} \mathcal{P}_l\right] iL\, f_{j-1}$$

$$\mathring{f}_j = \left[1 - \sum_{l=0}^{j-1} \mathcal{P}_l\right] iL\, f_j$$

のごとき連分数表示を持つ。我々の問題で調べてみると、

$$\omega_0' = \omega_1' = \cdots = \omega_n' = \cdots = 0$$

$$f_0 = p$$

$$f_1 = \mathring{p} = -\omega_0^2 x - \sum_s \Lambda_s x_s$$

$$f_2 = -\sum_S \Lambda_S\, p_S$$

$$f_3 = \sum_S \Lambda_S \left(\omega_S^2 - \frac{\omega_L^2}{4}\right) x_S$$

etc.

であり、それらの内積は、次のような簡単な形を持つ。

$$\Delta_1^2 = \omega_0^2$$

$$\Delta_2^2 = \Delta_3^2 = \Delta_4^2 = \cdots = \frac{K}{M} \equiv \Delta^2$$

その結果、$\Xi(z)$の無限連分数展開は、次のように収束して、

$$\Xi_0(z) = \cfrac{1}{Z + \cfrac{\omega_0^2}{Z + \cfrac{\Delta^2}{Z + \cfrac{\Delta^2}{Z + \cfrac{\Delta^2}{Z + \ddots}}}}} = \frac{Q+1}{QZ + \sqrt{Z^2 + \omega_L^2}}$$

これはまさしくRubinによつて調べられたexactな結果である。$\Xi(z)$のpole $Z = -\omega_L/\sqrt{Q^2-1}$ が前述のdecayをあらわし、$Z = \pm i\omega_L$ を結ぶcutからの寄与は、$Q \gg 1$ ではあまり利かないことがわかつている。

5° この計算では、1次元格子についてよく知られている結果を、Moriの方法を用いて導出したが、2次元、3次元ではどうであろうか。3次元の場合に見られる振動は、$\Xi(z)$のrandom forceに起因するpoleが、ある条件のもとに実軸上から離れることによつて出現するものと推測される。また2次元の場合、運動はnon-Markoffianとされているが、Moriの方法はこの場合にも有効であるから、新しい結果も得られると期待されよう。

更にAnharmonicityをとり入れることが今後の問題である。

終りに、御指導頂きました久保亮五先生、森肇先生、適切な討論をして頂いた斯波弘行氏、鈴木増雄氏に感謝致します。

References

1) H. Mori; Prog. Theor. Phys. 33, 423 (1965)
2) R. J. Rubin; J. Math. Phys. 1, 309 (1960)
R. J. Rubin; J. Math. Phys. 2, 373 (1961)
3) M. Toda & Y. Kogure; Prog. Theor. Phys. Suppl. 23, 157 (1962)
4) H. Mori; Prog. Theor. Phys. 34, 399 (1965)